

Соединения (**VIII**) являются исходными реагентами в синтезе биологически активных антиоксидантов.

Работа выполнена при финансовой поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 годы» (госконтракт № П – 1108).

ДИАЛКИЛДИТИОКАРБАМАТЫ КРЕМНИЯ В СИНТЕЗЕ АЛКИНИЛСИЛАНОВ

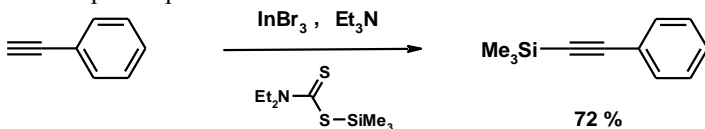
Турмасова А.А., Кошкин В.В.

Кубанский государственный университет
350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, д. 149

Диалкилдителиокарбаматы кремния, легко образующиеся при взаимодействии аминосиланов с сероуглеродом, являются перспективными силилирующими реагентами. Известно, что они могут быть использованы для силилирования спиртов и карбоновых кислот, однако эти сведения ограничены лишь несколькими публикациями. Нам представлялось интересным изучить возможность использования дителиокарбаматов кремния для силилирования 1-алкинов.

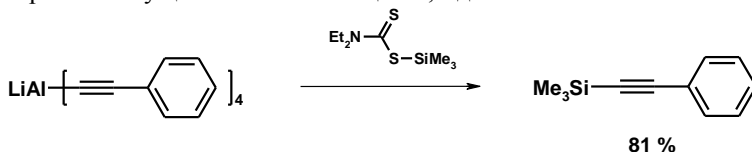
Установлено, что лучший выход продукта силилирования достигается при проведении реакции в 1,2-дихлорэтано в присутствии экви-

мольных количеств трибромида индия и триэтиламина при нагревании при кипении растворителя в течение 6 часов:



Использование хлорида цинка, бромида кадмия, а также трибромида индия без эквимольного количества триэтиламина гораздо менее эффективно.

Взаимодействие тетрафенилэтинила лития с дитиокарбама-том кремния осуществляли в кипящем 1,4-диоксане:



Максимальный выход продукта силилирования достигается при проведении реакции в течение 6 часов, дальнейшее нагревание не приводит к увеличению выхода.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ НИТРОФУРОКСАНОВ

Федотова Е.И., Белик А.В.

Челябинский государственный университет
454001, г. Челябинск, ул. Бр. Кашириных, д. 129

Фуруксановый цикл занимает особое место среди различных азолов, поскольку он содержит два атома активного кислорода, которые не связаны с атомами углерода и водорода, а включены в «скрытую» нитрогруппу. Нитрофуруксаны интересны в качестве потенциальных компонентов энергоемких составов. В данной работе проведены квантово-химические расчеты в рамках теории функционала плотности методом B3LYP с использованием базисного набора 6-31G (d,p) молекул 3-нитрофуруксана (а) и 4-нитрофуруксана (б). Изучено электронное строение этих соединений, а также было вычислено силовое поле в декартовой системе координат, которое затем было переведено в координаты X_{8° , представляющие собой компоненты изменений векторов связей в своих для каждой связи декартовых системах координат. Этот подход был разработан Маянцем Л.С и Шалтупером Г.Б. [1].